



Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine Elektrik Alan Etkisi

E. B. AL^a, Y. E. YILDIZ^a ve F. UNGAN^{b,*}

^aFen Fakültesi, Fizik Bölümü, Cumhuriyet Üniversitesi, 58140 Sivas, Türkiye

^bTeknoloji Fakültesi, Optik Mühendisliği Bölümü, Cumhuriyet Üniversitesi, 58140 Sivas, Türkiye

Received: 11.03.2013; Accepted: 31.12.2015

Özet. Bu çalışmada GaInNAs/GaAs tek kuantum kuyusundaki 1s, 2s ve 2p± donör safsızlık enerji düzeyleri arasındaki kızılötesi geçişler üzerine elektrik alan, azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntem kullanılarak incelenmiştir. Sonuçlar donör safsızlık atomunun konumu ve kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak sunulmuştur.

Anahtar Kelimeler: Tek kuantum kuyusu, Bant Anti-Crossing (BAC) modeli, Safsızlık bağlanma enerjisi, Seyreltik III-N-V yarıiletkenler

Electrical Fields Effect on Infrared Transitions Between Impurity Levels

Abstract. In this study, the effects of electric fields, the concentrations of nitrogen and indium on infrared transitions between 1s, 2s ve 2p± donör impurity energy levels at the single GaInNAs/GaAs quantum well are investigated using the variational method in the framework of the effective mass approximation.

Keywords: Single quantum well, band anti-crossing (BAC) model, Impurity binding energy, Dilute III-N-V semiconductors

1. GİRİŞ

Son yirmi yılda, hem farklı fiziksel özellikleri hem de optoelektronik cihazlardaki kullanım potansiyelleri sayesinde seyreltik azotlu alaşım yarıiletkenlerden olan $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ materyal sistemine olan ilgi giderek artmıştır [1, 2]. $Ga_{1-x}In_xAs$ içerisine seyreltik oranda ilave edilen azot, örgü içerisinde arsenik atomlarının yerine geçer ve $Ga_{1-x}In_xAs$ yarıiletkenin örgü sabitini küçültür.

$Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ alaşım yarıiletkeni içindeki atomların konsantrasyonları değiştirilerek bant aralığı ve örgü sabiti belirli sınırlar içerisinde değiştirilebilir. Teoride, değişen azot miktarına bağlı olarak $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ alaşım yarıiletkeninin bant aralığının 0.6–1.42 eV arasında değişebileceği öngörülmektedir [3]. Bu özelliği sayesinde kayıpların ve dispersiyonun

*Corresponding author. Email: fungan@cumhuriyet.edu.tr

en az olduđu 1,2–1,6 μm aralığındaki optik haberleşme çerçevesinde çalışabilen optoelektronik aygıtların geliştirilmesinde kullanılabilir.

Doksanlı yılların sonunda Kondow'un $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ ile ilgili ilk çalışmasının yayınlanmasının ardından bu yapılar, günümüz fiber optik iletişim teknolojisinin temelini oluşturan InP tabanlı III-V grubu yarıiletken sistemlerine alternatif olarak düşünölmeye başlanmıştır [4].

InP tabanlı III-V grubu alaşım yarıiletkenlerin fabrikasyonu sonucu elde edilen lazer, detektör ve optik yükselteç gibi optoelektronik aygıtların yüksek üretim maliyeti, iletim bant süreksizliğinin küçük olmasından dolayı ortaya çıkan sıcaklığa duyarlılıkları ve üretim zorlukları gibi dezavantajları bulunmaktadır. GaAs tabanlı $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ alaşım yarıiletkenlerinde, tabakalar arasındaki örgü uyumunun daha iyi olması ve iletim bandı süreksizliklerinin InP tabanlı yapılara göre daha büyük olması sayesinde bu problemler nispeten aşılması durumdadır [5, 6, 7]. Bu malzemeler, optik haberleşmede kullanılma potansiyellerinin yanı sıra 1 eV civarındaki bant aralıkları ve örgü sabitindeki esneklikleri sayesinde çok katmanlı güneş hücrelerinde de verimi arttırmaya yönelik kullanılma potansiyeline sahiptirler [8].

Teorik hesaplarda, azotun sadece iletim bandına etki edip değerlik (valans) bandına etki etmediğı, dolayısıyla boşluk hareketliliğinin elektron hareketliliğinden daha yüksek olması öngörülmektedir. Sun ve arkadaşları tarafından tek kuantum kuyulu n- ve p-tipi $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ üzerinde yapılan teorik ve deneysel çalışmalar ile bu öngörü desteklenmeye çalışılmıştır [9].

Yarıiletken tabanlı bir aygıtta performansın artırılması için kristal içerisindeki kusurların en aza indirilmesi gerekmektedir. Literatürdeki pek çok çalışmada, büyütme sonrası belirli sıcaklık ve sürelerde uygulanan termal işlem sayesinde hem kristal kalitesinin arttığı hem de kusurların nispeten azaldığı görölmektedir [6, 10, 11].

Bu çalışmada farklı azot ve indiyum konsantrasyonları için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun elektronik yapısı, hidrojenik donör safsızlık düzeyleri ve bu safsızlık düzeyleri arası geçiş enerjileri; yapının simetrisi, uygulanan elektrik alanının büyüklüğü ve safsızlık atomunun konumuna göre etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel hesap tekniğı ile belirlenecektir. Terahertz rejiminde düzeyler arası geçişlere dayalı yeni cihazların yapımında oldukça önemli bir yer tutan donör geçiş enerjileri, elektrik alanın büyüklüğü ve yapının simetrisine göre hesaplanarak elde edilen sonuçların uygulamaya getireceğı katkılar göz önünde bulundurularak yorumlanacaktır.

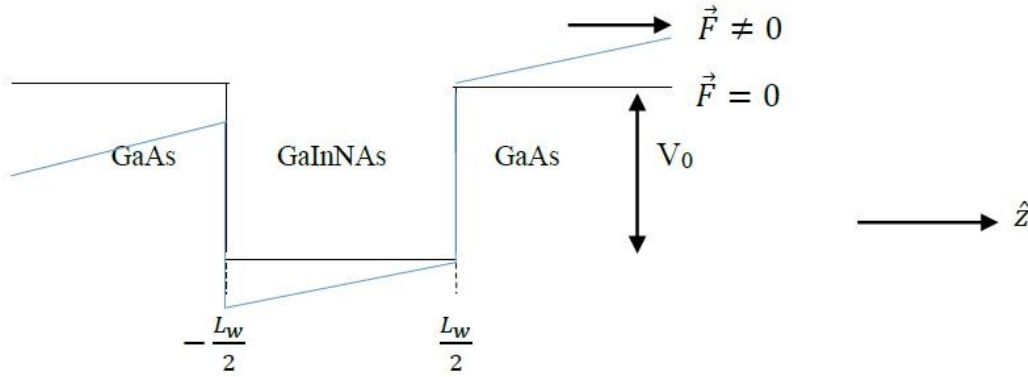
2. TEORİ

Bu bölümde, Şekil 1’de şematik olarak gösterilen, büyütme doğrultusunda (z doğrultusu) uygulanan elektrik alan altındaki $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonları etkisi etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminin çözümü yapılarak incelenecektir.

Büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan altındaki $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin Hamiltonian’ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(z) + V_C + |e|Fz \quad (1)$$

şeklinde yazılır. Burada, p elektron momentum operatörü, m^* elektron etkin kütlesi, $V(z)$ kuşatma potansiyeli, V_C elektron ile donör atomu arasındaki Coulomb potansiyeli, e temel elektrik yükü, F büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanın büyüklüğü ve z büyütme doğrultusudur.



Şekil 1. Büyütme doğrultusunda uygulanan \vec{F} elektrik alan altındaki $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun şematik gösterimi.

$V(z)$ kuşatma potansiyeli

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & , \quad z < -\frac{L_w}{2} \\ 0 & , \quad -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ V_0 & , \quad z > \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (2)$$

biçimindedir. Burada,

$$V_0 = Q_C \Delta E_g, \quad (3)$$

$$\Delta E_g = E_g(GaAs) - E_g(GaInNAs) \quad (4)$$

ve $Q_C = 0,8$ olarak alınmıştır. Elektron ve donör arasındaki Coulomb potansiyeli

$$V_C = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad (5)$$

ve

$$r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2} \quad (6)$$

şeklinde yazılır. Burada x , y ve z elektronun konumunu; x_i , y_i ve z_i ise donör atomunun konumunu göstermektedir.

Elektronun momentum operatörü \vec{p} ;

$$\vec{p} = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \right), \quad (7)$$

kuşatma potansiyeli ve Coulomb potansiyeli Denklem 1'de yerine yazılırsa kartezyen koordinatlarda sistemin Hamiltonian'ı;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + |e|Fz \quad (8)$$

şeklinde elde edilir.

$$x = \rho \cos \phi$$

$$y = \rho \sin \phi \quad (9)$$

$$z = z$$

koordinat dönüşümleri yapılırsa kutupsal koordinatlarda Hamiltonian ifadesi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) + |e|Fz \quad (10)$$

Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine

olarak elde edilir. Burada ρ

$$\rho = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}, \quad (11)$$

x - y düzleminde elektron ile donör arasındaki bağıl uzaklıktır. Hamiltonian'deki tüm uzunluklar etkin Bohr yarıçapı ($a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$) ve tüm enerji terimleri Rydberg ($R = \frac{e^2}{2\epsilon a_B}$) cinsinden yazılarak boyutsuz Hamiltonian;

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2}\right) - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} + \tilde{V}(\tilde{z}) + |e| \tilde{F} \tilde{z} \quad (12)$$

biçiminde elde edilir. $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki elektron-donor atomu için Schrödinger denklemi;

$$\tilde{H}\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) = \tilde{E}\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) \quad (13)$$

biçimindedir. Burada

$$\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) = \varphi(\tilde{z})\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) \quad (14)$$

ve $\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda)$, üç boyutta Coulomb etkileşimini içeren deneme dalga fonksiyonudur. 1s, 2s ve 2p_± düzeylerini temsil eden deneme dalga fonksiyonları

$$\phi_{1s}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda_1) = N_1 e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_1}}, \quad (15)$$

$$\phi_{2s}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \beta, \lambda_2) = N_2 (1 - \beta \sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}) e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_2}}, \quad (16)$$

$$\phi_{2p_{\pm}}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \phi, \lambda_3) = N_3 \rho e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_3}} e^{\pm i\phi}, \quad (17)$$

şeklinindedir. Burada N_1 , N_2 ve N_3 normalizasyon katsayıları; λ_1 , λ_2 ve λ_3 varyasyon parametreleri ve β , 1s ve 2s deneme dalga fonksiyonlarının ortogonalite koşulundan belirlenebilen bir sabittir.

$\varphi(\tilde{z})$, elektronun z doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur ve genişliği $L_b = 2L$ olan sonsuz potansiyel kuyusunun özfonksiyonlarından oluşan çözümleri baz alınarak oluşturulmuştur. Bu bazlar genel formda;

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left(\frac{n\pi\tilde{z}}{L_b} - \delta_n\right) \quad (18)$$

biçimindedir. Burada δ_n , L_b genişliğindeki sonsuz kuantum kuyusunun özfonksiyonlarındaki tek ve çift çözümlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere;

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n \text{ tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n \text{ çift ise} \end{cases} \quad (19)$$

değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu;

$$\varphi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z}) \quad (20)$$

biçiminde bir tam setten oluşur. Sistemin toplam enerjisi;

$$\tilde{E} = \min_{\lambda} \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle \quad (21)$$

varyasyon teoreminden elde edilir. Bu eşitlik sayesinde \tilde{E} özdeğerini minimum yapan λ varyasyon parametreleri belirlenir. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri;

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H} \rangle = \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle = & - \left\langle \psi \left| \frac{\partial^2}{\partial \tilde{p}^2} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{1}{\tilde{p}} \frac{\partial}{\partial \tilde{p}} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{1}{\tilde{p}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{p}^2} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right| \psi \right\rangle + \langle \psi | \tilde{V}(\tilde{z}) | \psi \rangle - \\ & \left\langle \psi \left| \frac{2}{\sqrt{\tilde{p}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \right| \psi \right\rangle + |e| \tilde{F} \langle \psi | \tilde{z} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (22)$$

olmak üzere, taban durumda bulunan donör atomunun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak;

$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_g - \langle \tilde{H} \rangle \quad (23)$$

Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine

eşitliği ile elde edilir. Burada \tilde{E}_g , elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjisidir.

Enerji düzeyleri arasındaki olası geçişler $\delta n \neq 0$, $\delta l = \pm 1$ ve $\delta m_l = 0, \pm 1$ koşullarıyla gerçekleşir ve ilgili iki bağlanma enerjisinin mutlak farkından türetilir

$$\delta E_B = |E_{B_2} - E_{B_1}|. \quad (24)$$

Bu enerjiye karşılık gelen frekans ise

$$\omega = \frac{\delta E_B}{\hbar} \quad (25)$$

bağıntısından hesaplanır.

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Teori bölümünde ileri sürülen yaklaşımlar sonucunda elde edilen analitik denklemler, bilgisayar programları yardımıyla çözülmüştür. İlk olarak $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun, azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı incelenmiştir. Elde edilen sonuçların literatür ile uyumlu olduğu görülmüştür [12]. Daha sonra sistemin kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanı ve kuantum kuyu genişliğinin etkisi incelenmiştir. Çalışmamızın devamında safsızlık enerji düzeylerinin bağlanma enerjileri hesaplanarak olası geçişlerin karşılık geldiği enerjiler ve bu enerjilere karşılık gelen frekans aralığı belirlenmiştir.

Şekil 2 ve Şekil 3'te sabit azot ve indiyum konsantrasyonu için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin farklı kuantum kuyu genişliklerinde elektrik alana göre değişimi verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi kuantum kuyusunun genişliğinin artması ile yapıda kuşatılan alt-bant durum sayısı artmıştır. Alt-bant durum sayısı ve enerjilerinin kuyu genişliği ile ayarlanabilir olması amaca uygun yeni optoelektronik devre elemanlarının tasarlanmasında önemli bir ayar parametresidir. Ayrıca burada, büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanının etkisi ile kuantum kuyusunda kuşatılmış olan negatif yüklü elektronların

yapının soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine neden olduğu görülmektedir. Kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alan etkisi ile taban durum enerji seviyelerindeki azalmanın daha büyük olduğu görülmektedir. Çünkü dar kuyularda geometrik kuşatma etkilidir ve taban durum enerji seviyeleri geniş kuyulara göre daha büyük değerler almaktadır. Geniş kuyulardaki enerji seviyelerinin kuyu tabanına yakınlığı dikkate alındığında dar kuyulardaki taban durum enerji seviyesinin kuyu tabanından çok yukarıda olduğu söylenebilir. Kuyu tabanına yakın seviyeler elektrik alandan çok fazla etkilendikleri halde dar kuyularda büyük değerli enerji seviyelerindeki kaymanın az olması da yüksek enerjili seviyelerin elektrik alandan daha az etkilenmesi şeklinde açıklanabilir. Ayrıca bu şekillerden elektrik alan etkisi ile elektron dalga fonksiyonlarının engel içine sızma olasılığının arttığı açıkça görülmektedir. Bu davranış aynı zamanda elektro-optik cihazlar için önemli bir faktör olan kuyu içindeki bir bölgede yük birikiminin gerçekleştiğini göstermektedir. Sonuç olarak düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alanın etkilerinin incelenmesi yeni geliştirilecek optoelektronik aygıtlar için önemli bir faktördür. Şekil 4'te görüldüğü gibi, azot konsantrasyonunun artması safsızlık atomunun bağlanma enerjilerini artırmaktadır. Azot konsantrasyonunun artması, sistemin kuşatma potansiyelini büyüteceği için elektron ile donör safsızlık atomu arasındaki Coulomb etkileşimini, dolayısıyla safsızlık atomunun bağlanma enerjisini artırır ve elektron-safsızlık atomu arasındaki hidrojen benzeri yapı daha kararlı hale gelir. Aynı zamanda azot konsantrasyonunun artması etkin kütleli de artırarak elektronun ağırlaşmasına ve kuyu içinde daha iyi lokalize olarak bağlanma enerjisinin artmasına neden olur.

Şekil 5'te, kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomu için bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimleri farklı indiyum konsantrasyonları için verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi tüm bağlanma enerjilerindeki değişimler Şekil 4 ile benzerdir. Fakat burada, indiyum konsantrasyonundaki artış, bağlanma enerjisini azaltmaktadır. Bunun nedeni, indiyum konsantrasyonu arttıkça elektron etkin külesinin azalmasıdır. İndiyum konsantrasyonunun artması ile kuşatma potansiyeli artmasına rağmen elektron etkin külesi azaldığı için elektron daha enerjik olacağından engel bölgesine sızma olasılığı artar ve buna bağlı olarak bağlanma enerjisi de azalır.

Şekil 6'da $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun taban ve uyarılmış düzeylerde bağlanma enerjilerinin elektrik alanı ile değişimi verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi elektrik alan değeri büyüdükçe sistemin bağlanma enerjisi azalmaktadır. Bağlanma enerjisindeki bu azalmanın nedeni; elektrik alanın etkisi ile

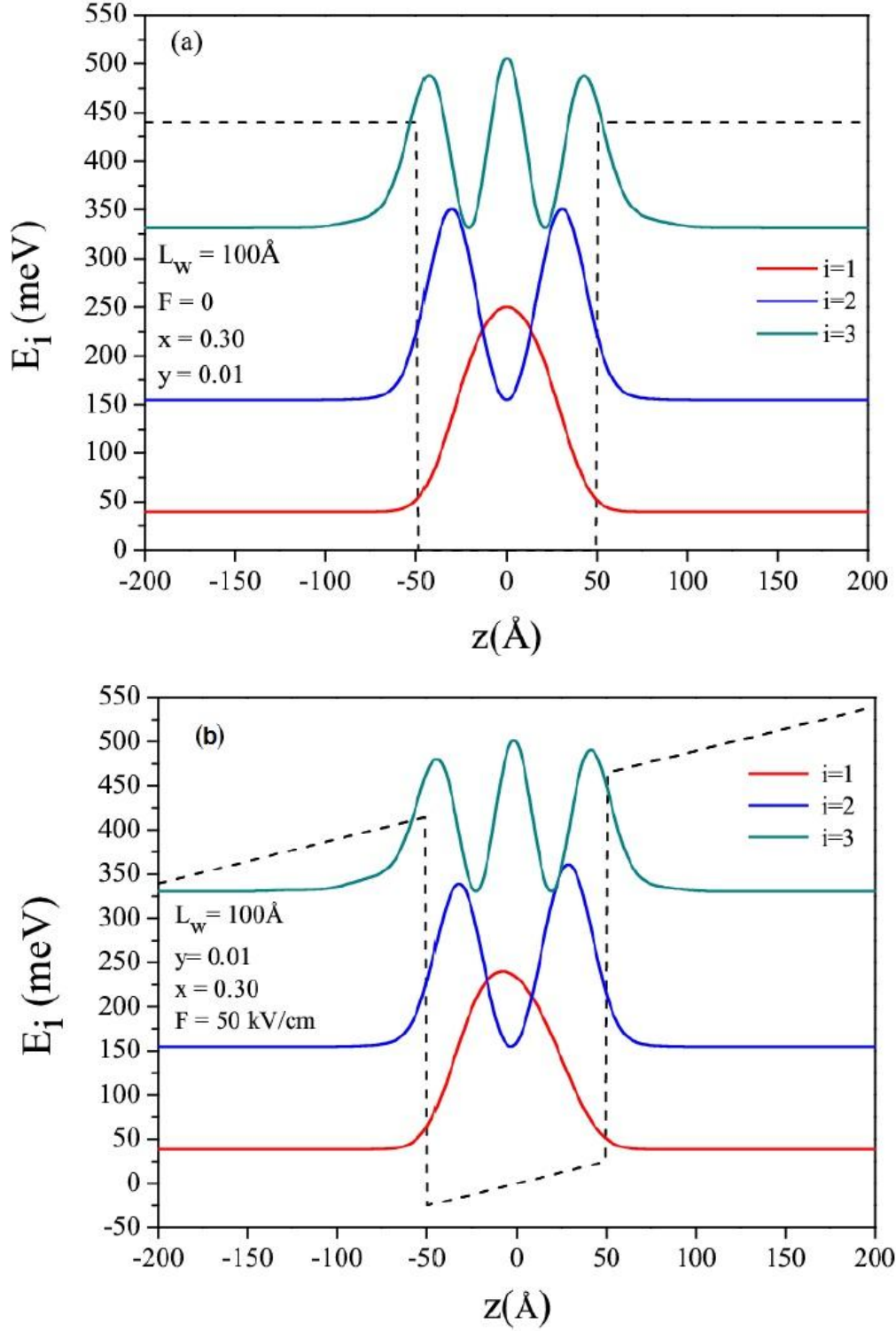
Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine

kuantum kuyusunda kuşatılmış olan elektronların kuyunun soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine neden olmasıdır. Böylece safsızlık atomu ile elektronun birbirlerini görme olasılığı azalır ve bağlanma enerjileri küçülür.

Şekil 7' de, sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için genişliği $L_w = 150 \text{ \AA}$ olan $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun $F = 0$ ve $F = 50 \text{ kV/cm}$ değerinde iki farklı elektrik alan altında bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre nasıl değiştiği görülmektedir. Elektrik alanın yokluğunda, elektronun kuyu merkezinde bulunma olasılığı diğer yerlerde bulunma olasılığından daha fazladır. Bu nedenle maksimum bağlanma enerjisi, kuyu merkezine yerleşen safsızlık atomu için elde edilir. Elektrik alanın etkisiyle elektronlar kuyunun soluna doğru kayacağından elektronların kuyunun sol tarafında bulunma olasılıkları artar ve bağlanma enerjisinin maksimum olduğu konum, merkezden sola doğru bir miktar kayar. Yaklaşık olarak bağlanma enerjisinin maksimum olduğu konum $z_i = -25 \text{ \AA}$ civarında oluşur.

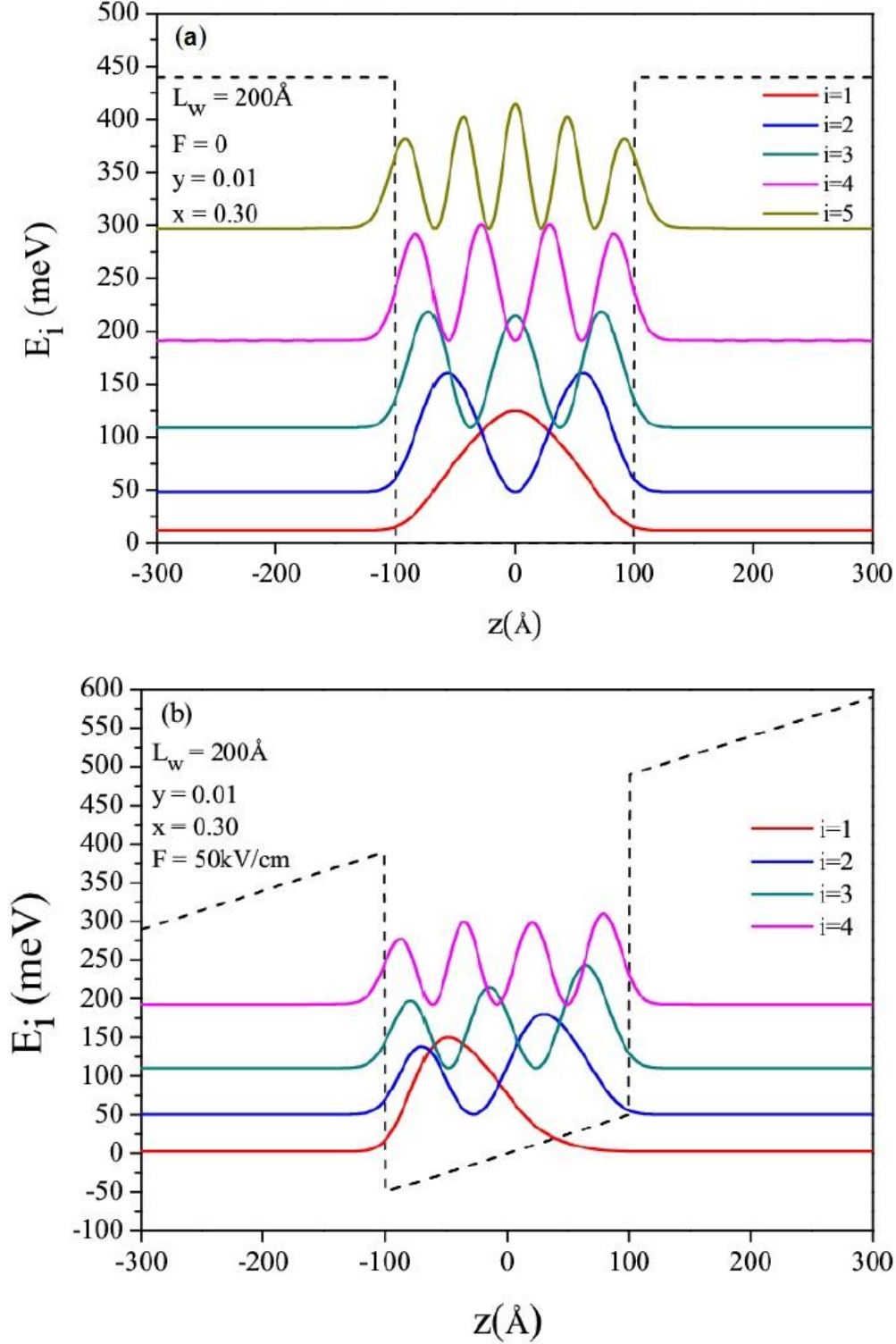
Şekil 8'de, $F = 0$ ve $F = 50 \text{ kV/cm}$ değerinde iki farklı elektrik alan değeri için $1s-2p_{\pm}$ geçiş enerjileri, sistemin merkezinde bulunan bir safsızlık atomu için sabit indiyum ve azot konsantrasyonlarında $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun genişliğinin bir fonksiyonu olarak gösterilmiştir. Buradan görüldüğü üzere kuyu genişliği arttıkça ve elektrik alanın uygulanmasıyla geçiş enerjilerinin azaldığı görülmektedir. Bunun sebebi olarak elektrik alanın artmasıyla taban ve uyarılmış durumlarda bağlanma enerjilerinin azalmasından kaynaklanmaktadır.

Şekil 9'da sabit azot ve indiyum konsantrasyonlarında farklı elektrik alan değerleri için $1s-2p_{\pm}$ geçişlerinin frekans aralığı görülmektedir. Buradan görüldüğü üzere frekans aralığı THz mertebesindedir ve şekil olarak geçiş enerjileri ile birebir benzerlik göstermektedir. Sonuç olarak, $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sistemine farklı elektrik alan değerleri uygulanarak ve kuyu genişliği değiştirilerek THz bilimine katkıda bulunacak cihazlar üretilebilir.

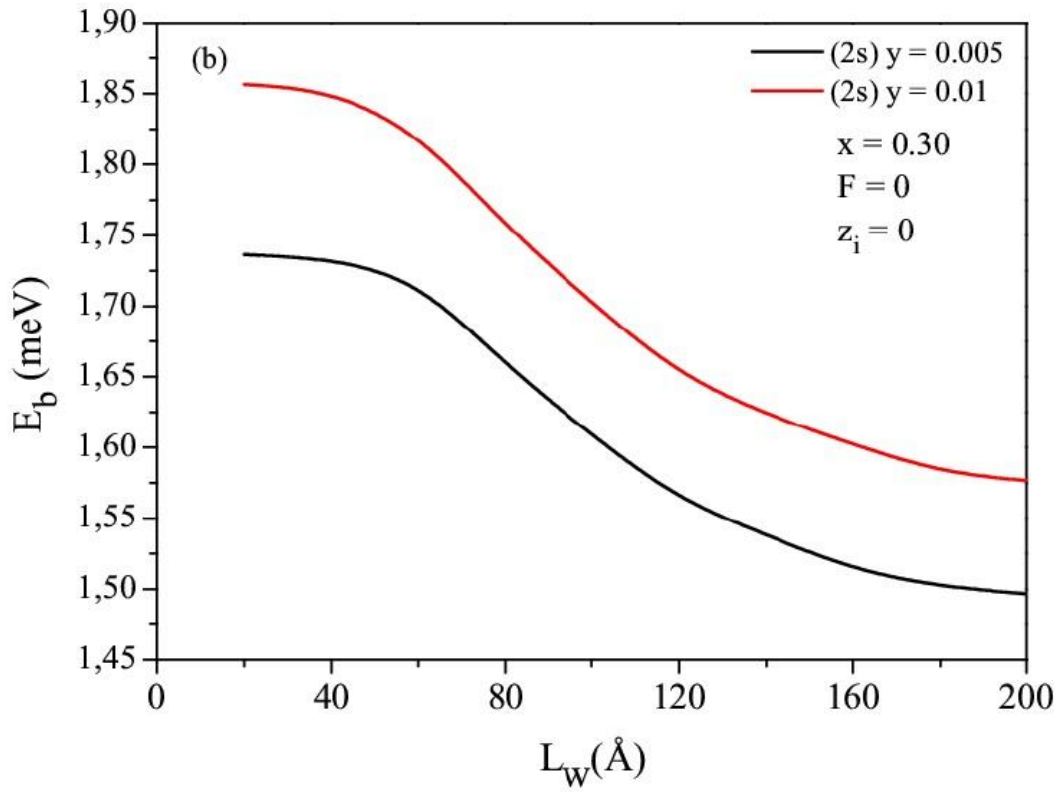
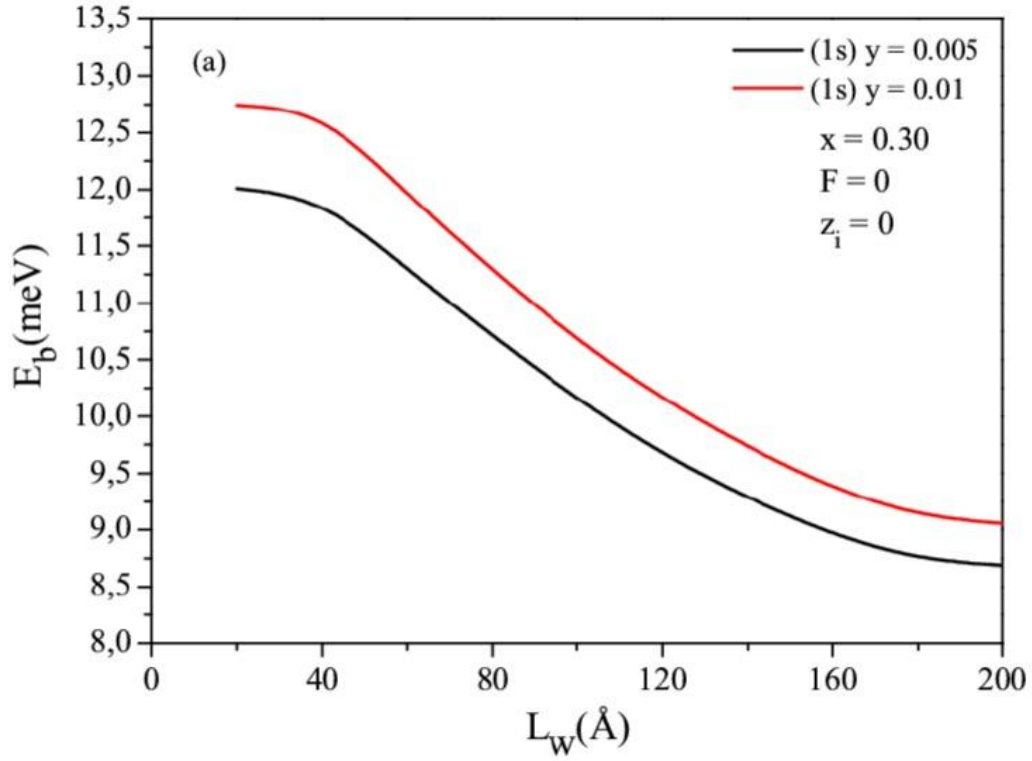


Şekil 2. $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin $L_w = 100 \text{ \AA}$ için (a) $F = 0$ ve (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ elektrik alanı altındaki değişimi.

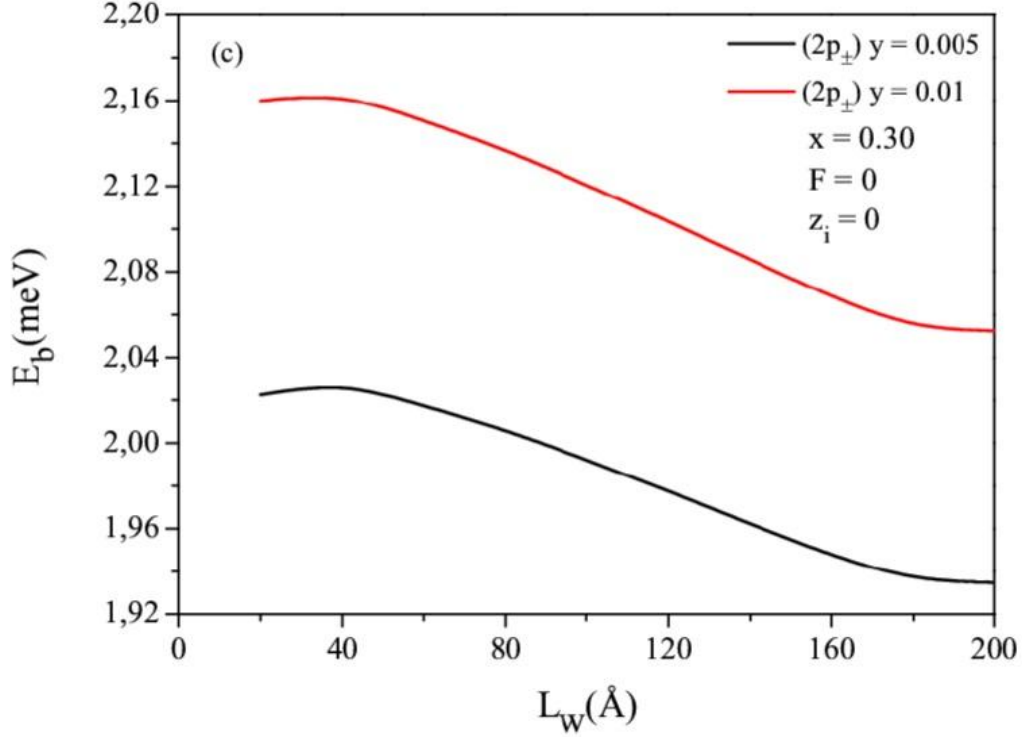
Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine



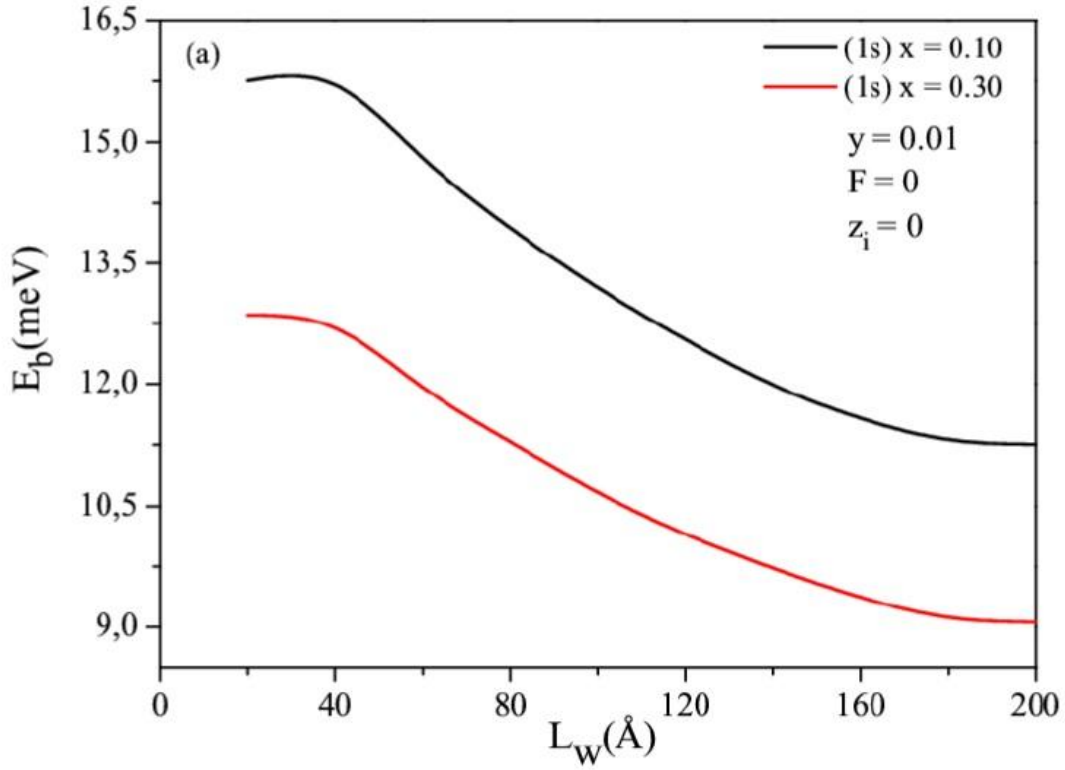
Şekil 3. $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin $L_w = 200 \text{ \AA}$ için (a) $F = 0$ ve (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ elektrik alanı altındaki değişimi.

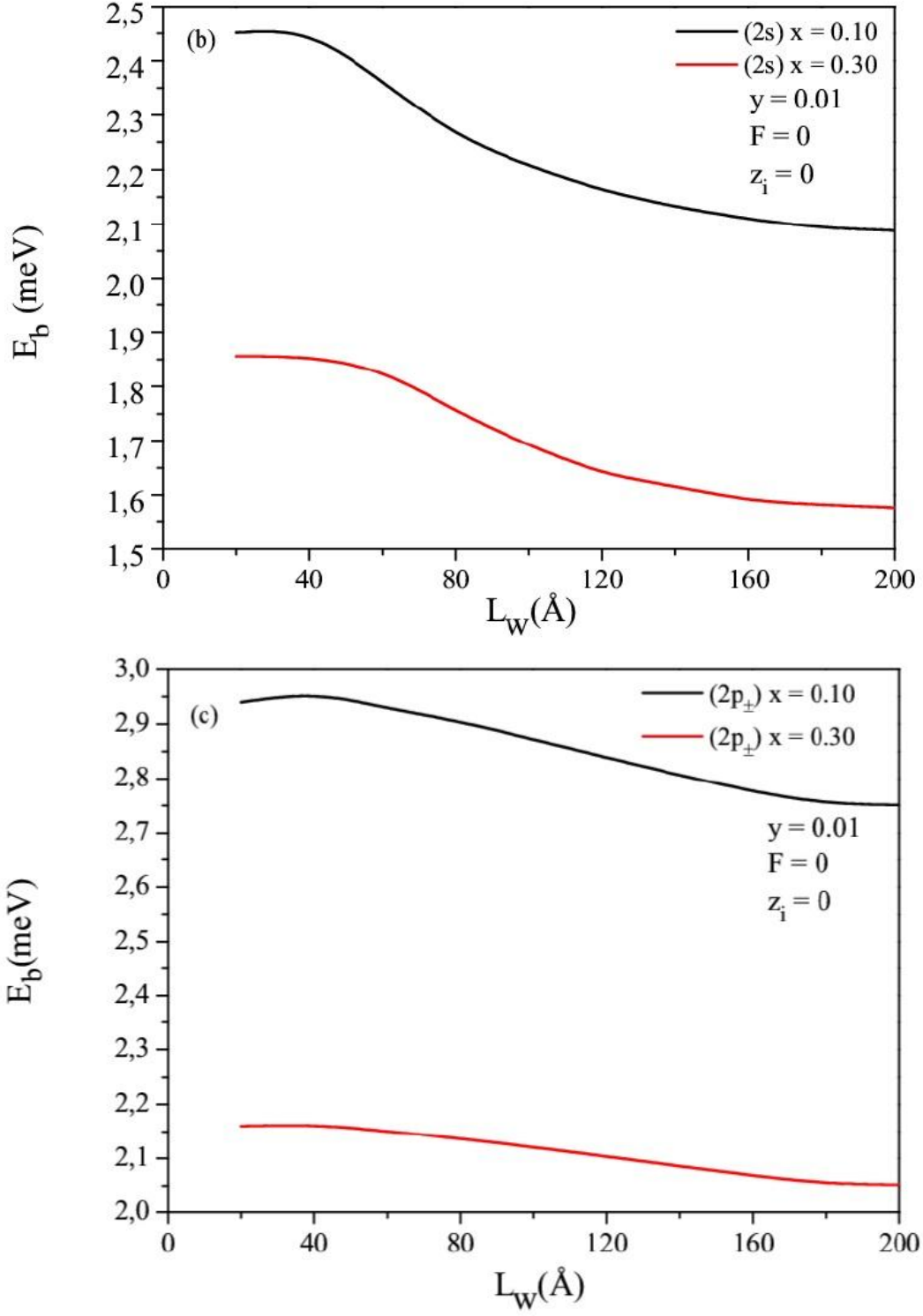


Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine



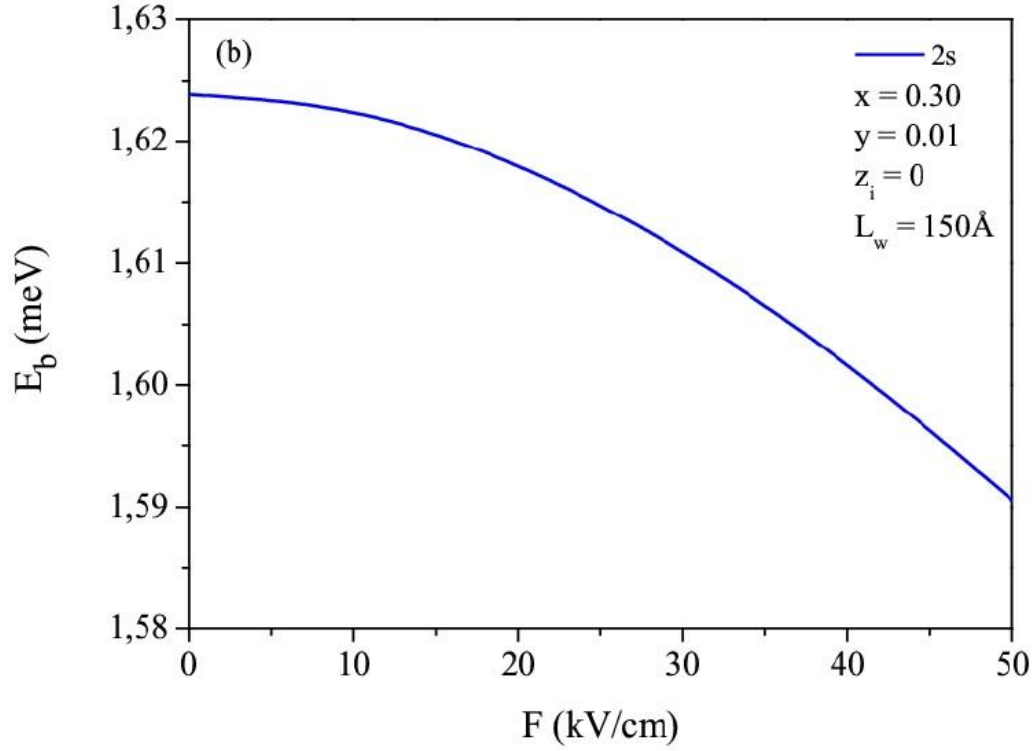
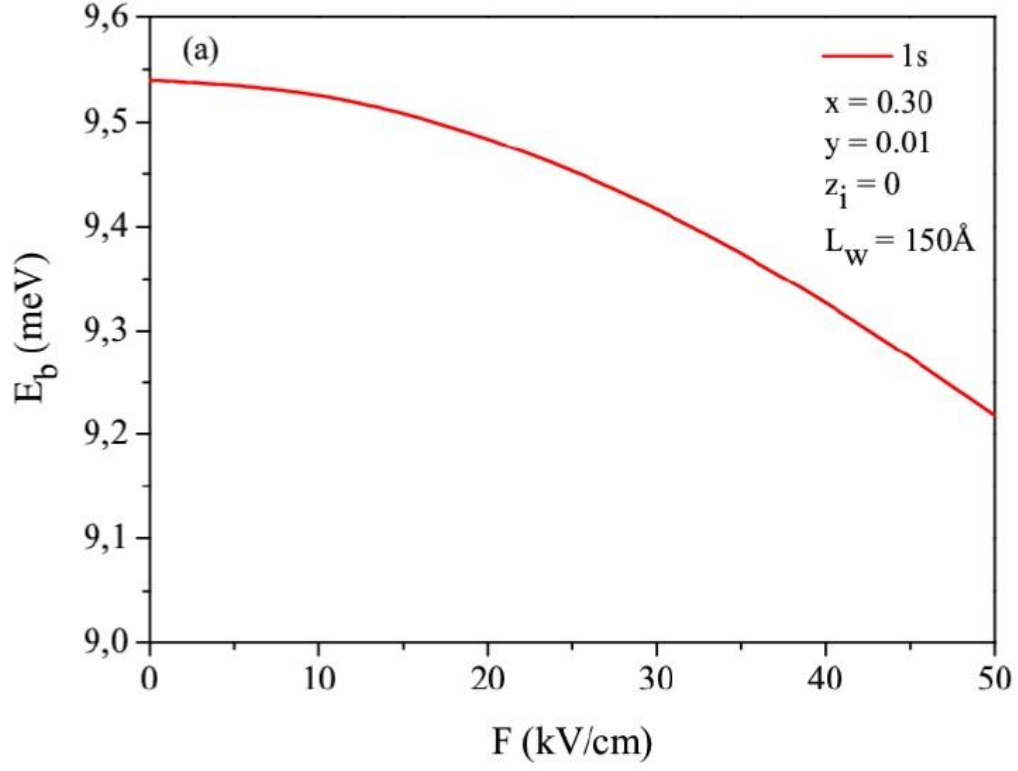
Şekil 4. İki farklı azot konsantrasyonu için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun (a) 1s, (b) 2s ve (c) 2p± düzeylerindeki bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi.

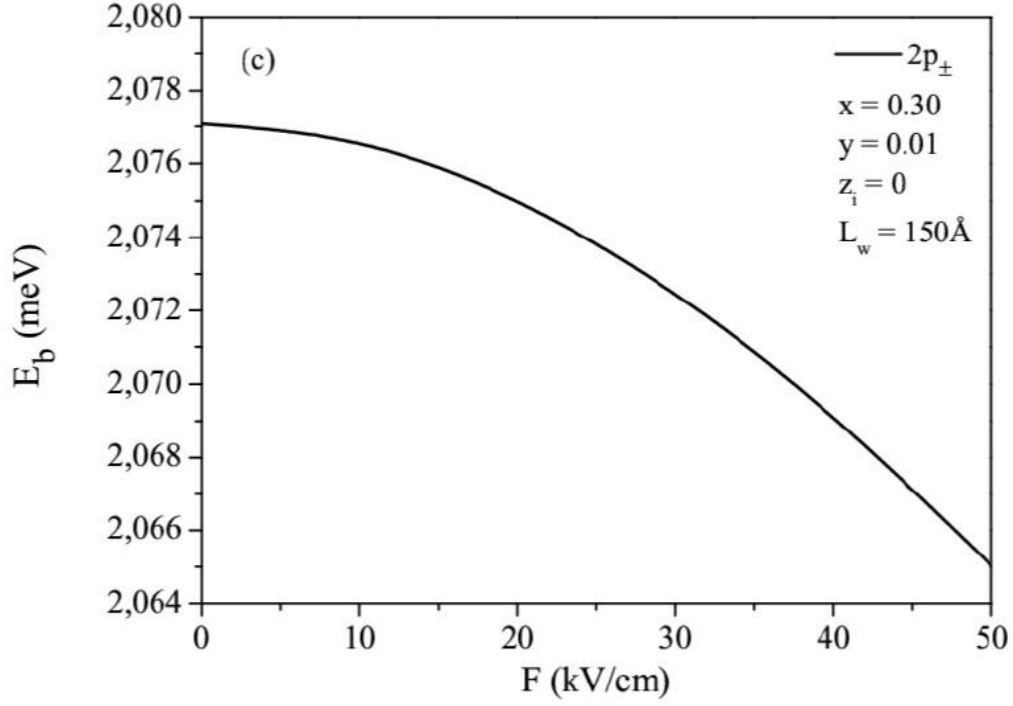




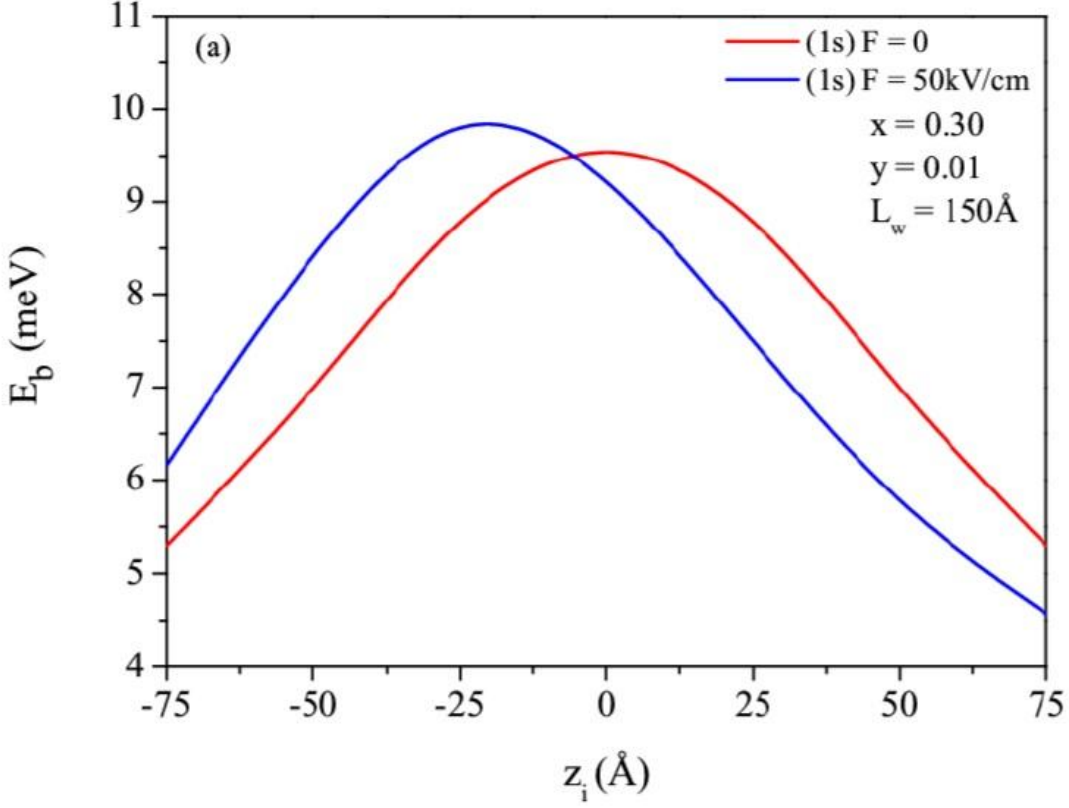
Şekil 5. İki farklı indiyum konsantrasyonu için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun (a) $1s$, (b) $2s$ ve (c) $2p_{\pm}$ düzeylerindeki bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi.

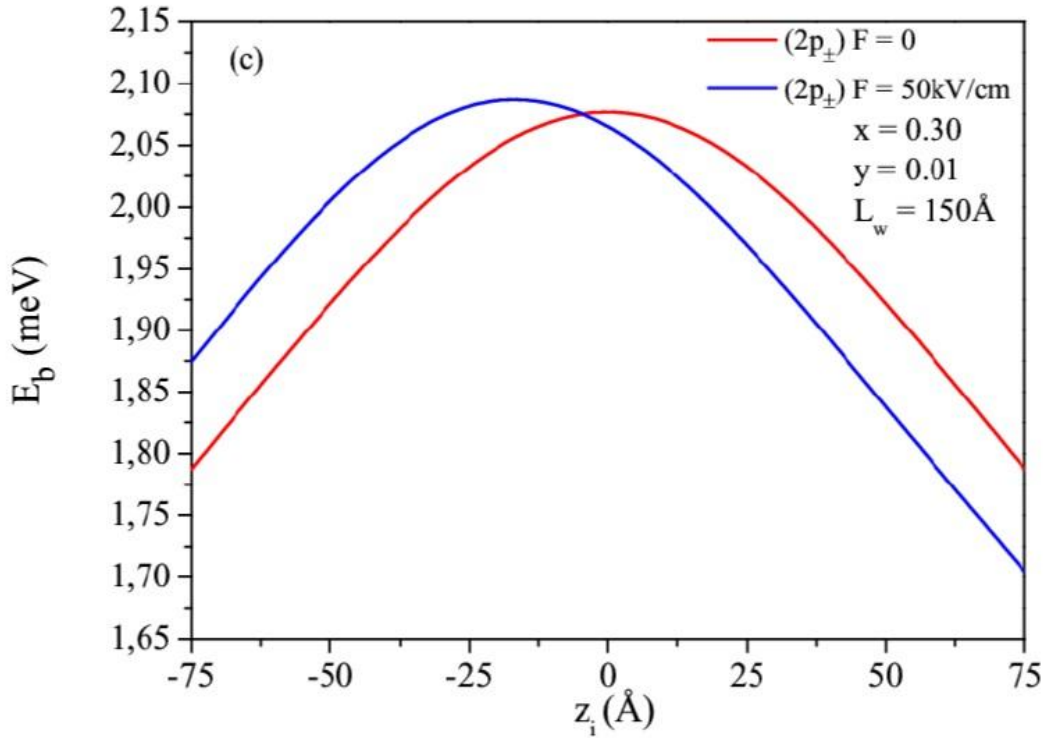
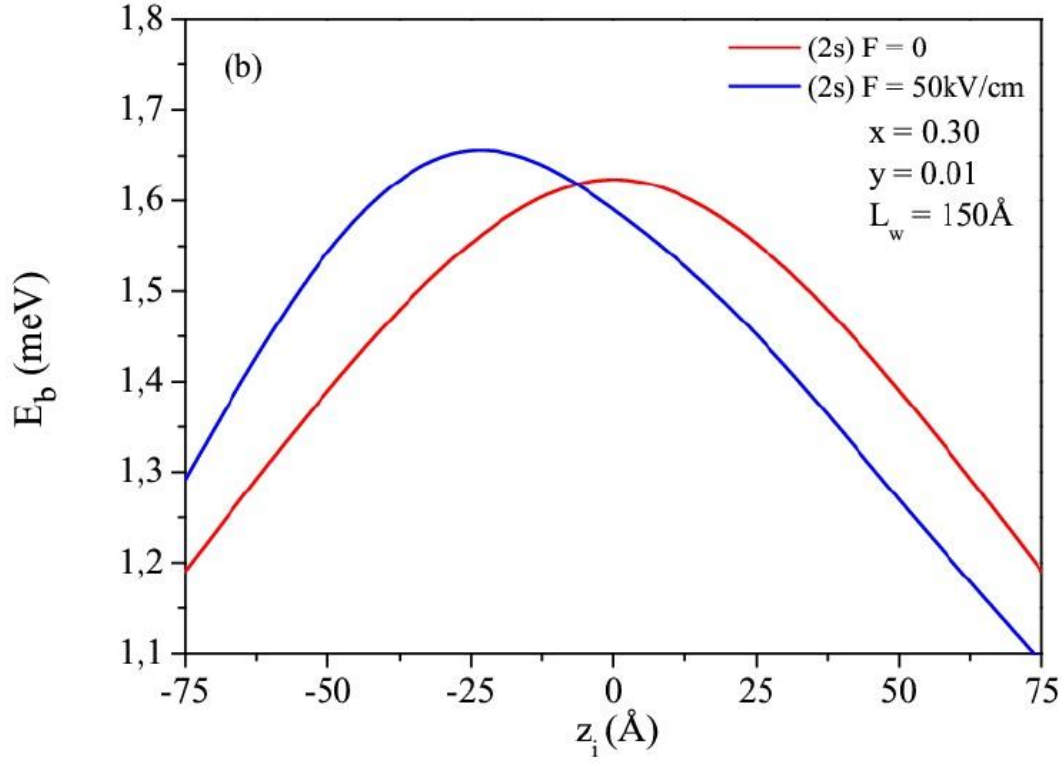
Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine



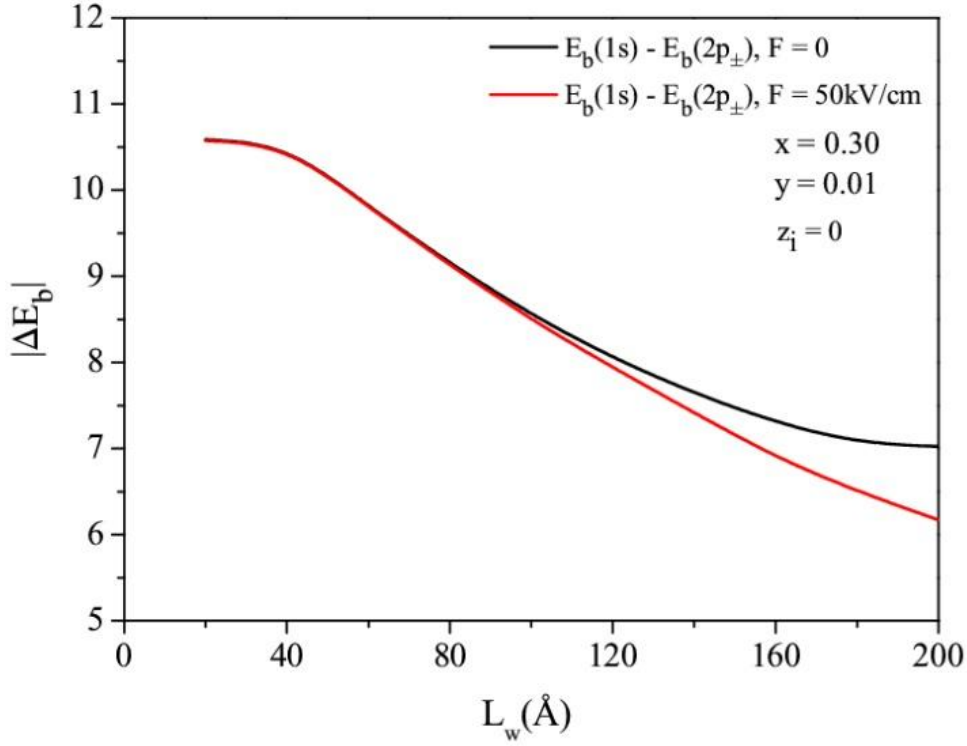


Şekil 6. $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun (a) 1s, (b) 2s ve (c) $2p_{\pm}$ düzeylerindeki bağlanma enerjilerinin elektrik alana göre değişimi.

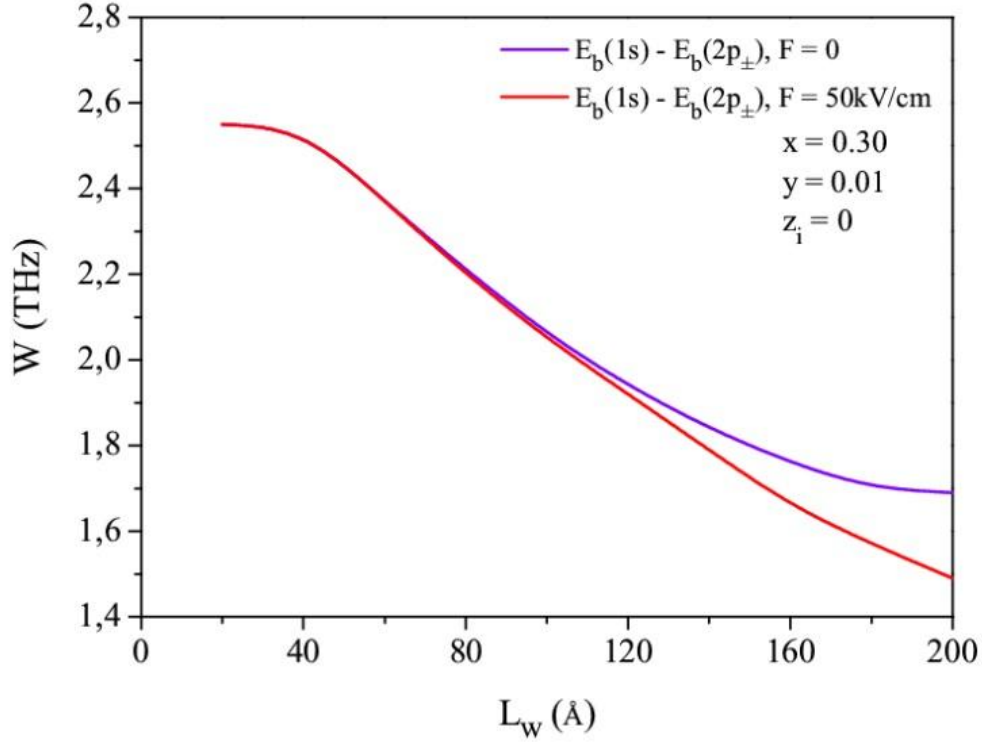




Şekil 7: Sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için elektrik alan altında $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun (a) 1s, (b) 2s ve (c) 2p_± düzeylerindeki bağlanma enerjilerinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.



Şekil 8. İki farklı elektrik alan değeri için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş enerjilerinin değişimi.



Şekil 9. İki farklı elektrik alan değeri için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş frekanslarının değişimi.

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada, $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu sisteminin potansiyel profili, bağlanma enerjisi, geçiş enerjileri ve geçiş frekansları üzerine azot ve indiyum konsantrasyonunun ve elektrik alanın etkisi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel hesap tekniği ile incelenmiştir.

Çalışmamızın ilk aşamasında, $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının, büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanının ve kuantum kuyu genişliğinin etkisi incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda, azot ve indiyum konsantrasyonunun artırılması ile oluşan iletim bandındaki bant kaymasının büyüdüğü, kuşatma potansiyelinin derinleştiği ve taşıyıcıların daha iyi kuşatıldıkları görülmüştür. Bu da gösteriyor ki azot ve indiyum konsantrasyonu sistem için önemli birer ayar parametresidir. Büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanının etkisi ile kuantum kuyusunda kuşatılmış olan negatif yüklü elektronların yapının soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine ve elektron dalga fonksiyonlarının engel içine sızma olasılığının artmasına neden olduğu görülmüştür. Bu davranış, aynı zamanda elektro-optik cihazlar için önemli bir faktör olan kuyu içindeki bir bölgede yük birikiminin gerçekleştiğini göstermektedir. Ayrıca, kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alan etkisi ile taban durum enerji seviyelerindeki azalmanın daha büyük olduğu sonucuna varılmıştır. Sonuç olarak, düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alanının etkilerinin incelenmesinin yeni geliştirilecek optoelektronik aygıtlar için önemli bir faktör olduğu açıkça görülmüştür.

Çalışmamızın devamında, büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanı altındaki $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki elektron ve safsızlık atomunun oluşturduğu yapının taban ve uyarılmış düzeylerinin bağlanma enerjileri, enerji düzeyleri arası geçiş enerjileri ve bu geçiş enerjilerine karşılık gelen geçiş frekansları üzerine azot ve indiyum konsantrasyonu, kuantum kuyu genişliği ve büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanının etkisi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda, küçük kuantum kuyu değerlerinde elektrik alanının bağlanma enerjisi üzerinde önemli bir etkisi gözlenmezken, kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alanla bağlanma enerjisinin azaldığı görülmüştür. Daha sonra sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için elektrik alanı altındaki $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi incelenmiştir. Elektrik alanının yokluğunda, elektronun kuyu merkezinde bulunma olasılığının, diğer yerlerde bulunma olasılığından daha fazla olduğu, elektrik alan uygulandığında ise

elektronların bulunma olasılıklarının kuyunun sol kenarına doğru kaydığını ve bağlanma enerjilerinin en yüksek olduğu merkez konumun da sola doğru kaydığı görülmüştür.

Çalışmamızın son aşamasında, iki farklı elektrik alan değeri için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş enerjilerinin değişimi incelenmiştir. Yapılan hesaplamalarda kuantum kuyu genişliği arttıkça geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlenmiştir. Bu geçiş enerjilerinden yola çıkarak $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin çalışma frekansı belirlenerek bu frekans bölgesinin THz mertebesinde olduğu görülmüştür.

Bu tez çalışmasında kullanılan yöntem, III-N-V bileşiklerden oluşturulmuş kuantum kuyu sisteminin elektriksel özelliklerini iyi bir şekilde tanımlama olanağı sağlamıştır. Kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonları ve safsızlık atomunun konumu değiştirilerek $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu sisteminin elektriksel özelliklerinin amaca uygun biçimde ayarlanabileceği görülmüştür. Elde edilen sonuçların teknolojiye ve aygıt tasarımına yeni katkılar sağlayacağı beklenmektedir. Bu sonuçlarla, özellikle geniş dalga boyu aralığını kapsayan veri depolama üniteleri, güneş pilleri, foto dinamik tedavi, gaz sensörleri, terahertz cihazlar gibi yeni birçok optoelektronik cihazın geliştirilmesi beklenebilir.

KAYNAKLAR

- [1] Erol, A. (Editör), 2008, "Dilute III-V nitride semiconductor and material systems", Springer, Berlin, 978-3-540-74528-0.
- [2] Henini, M. (Editör), 2005, "Dilute nitride semiconductor", Elsevier, Amsterdam, Netherlands, 0-08-044502-0.
- [3] Plimani, A., 2000, "Effect of temperature on the optical properties on (InGa)(AsN)/GaAs Single quantum wells", Appl. Phys. Lett., 77, 2870.
- [4] Kondow, M., Uomi, K., Hosomi, K., ve Mozume, T., 1994, "Gas source molecular beam epitaxy of GaN_xAs_{1-x} using a N radical as the N source", Jpn. J. Appl. Phys., 33, 1056.
- [5] Bisping, D., Ho, S., Pucicki, D., Fischer, M., ve Forchel, A., 2008, "Room-temperature singlemode continuous-wave operation of distributed feedback GaInNAs laser diodes at 1.5 μm ", Electron. Lett., 44, 6-7.
- [6] Ma, B. S., Fan, W. J., Dang, Y. X., Cheah, W. K., ve Yoon, S. F., 2007, "Annealing effects on the optical properties of a GaInNAs double barrier quantum well infrared photodetector", Appl. Phys. Lett., 91, 041905.

Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine

- [7] Chaqmaqchee, F. A. I., Mazzucato, S., Oduncuoglu, M., Balkan, N., Sun, Y., Gunes, M., Hugues, M. ve Hopkinson, M., 2011, “GaInNAs-based Hetero-structure vertical cavity semiconductor optical amplifier for 1.3 μm operation”, *Nanoscale Res. Lett.*, 6, 104.
- [8] Royall, B., ve Balkan, N., 2009, “Simulation of dilute nitride GaInNAs doping superlattice solar cells”, *IEE Proc-J*, 3, 296.
- [9] Sun, Y., Balkan, N., Aslan, M., Lisesivdin, S. B., Carrere, H., Arıkan, M. C., ve Marie, X., 2009, “Electronic transport in n- and p-type modulation doped Ga(x)In(1-x)N(y)As(1-y)/GaAs quantum wells”, *J. Phys., Condens. Matter*, 21, 174210.
- [10] Kaplar, R. J., Arehart, R., Ringel, S. A., Allerman, A. A., Sieg, R. M., Kurtz, S. R., 2001, “Deep levels and their impact on generation current in δn -doped InGaAsN”, *J. Appl. Phys.*, 90, 3405.
- [11] Hierro, A., Ulloa, J.-M., Chauveau, J.-M., Trampert, A., Pinault, M. A., Tournié, E., Guzmán, A., Sánchez-Rojas, J. L., Calleja, E., 2003, “Annealing effects on the crystal structure of GaInNAs quantum wells with large In and N content grown by molecular beam epitaxy”, *J. Appl. Phys.*, 94, 2319.
- [12] Kasapoglu E., Duque C. A., Sakiroglu S., Sari H. ve Sokmen I., 2011, “The effects of the intense laser field on donor impurities in a cylindrical GaIn_{1-x}NyAs_{1-y}/GaAs quantum dot under the electric field”, *Physica E*, 43, 1427.